

УДК 001.891.573

Л.И. Евельсон, Е.Г. Рыжикова

ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД ОПТИМИЗАЦИИ НА ОСНОВЕ ПЛАНИРОВАНИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Представлена методика проведения вычислительных экспериментов с учётом отклонений от традиционных допущений регрессионного анализа: допускаются существенные отличия закона распределения отклика от нормального закона, наличие точек плана с большим числом условно-недопустимых параллельных опытов, включая точки, в которых остается всего один опыт. Предложена модификация численного метода условной оптимизации квадратичных регрессионных моделей. Продемонстрирована ее эффективность в ситуациях обнаружения недопустимых опытов и точек матрицы плана на примере оптимизации параметров производственного процесса.

Ключевые слова: вычислительный эксперимент, метод оптимизации, регрессионная модель, недопустимые точки.

Теория планирования экспериментов изначально предназначалась для натуральных исследований. Её применение в компьютерном моделировании требует модификаций - как на этапе планирования, так и при обработке результатов. На этапе планирования вычислительных экспериментов требуется решить задачи разработки математических моделей исследуемых процессов, а также организации параллельных опытов в точках матрицы плана. При обработке результатов необходимо учесть ситуации отклонения распределения значений функции отклика от нормального закона, а также возникновения недопустимых опытов и точек в матрице планирования эксперимента.

К настоящему времени разработано большое количество методов математического моделирования, планирования экспериментов, обработки результатов, оптимизации. Их многообразие связано с тем, что для решения производственных задач разных классов требуется учет различных нюансов, и поэтому трудно выработать методы, которые обладали бы абсолютной универсальностью. Решение практических задач с помощью аппарата моделирования, планирования экспериментов может быть осложнено нарушением условий применимости методов, сложностью их реализации. Совершенствование методов планирования и обработки результатов компьютерных экспериментов, их адаптация к специфике производственных процессов является важной и актуальной комплексной задачей.

С учётом отмеченных модификаций разработана методика вычислительных экспериментов и усовершенствован метод оптимизации поверхности функции отклика.

Предлагается методика проведения вычислительных экспериментов, включающая следующие шаги:

1. Формируется математическая модель исследуемого производственного процесса, позволяющая определять целевую функцию.

2. Выделяются основные факторы и определяется область факторного пространства.

3. Составляется матрица планирования эксперимента для построения квадратичной регрессионной модели.

4. Выполняются условно-параллельные опыты. При проведении компьютерных экспериментов очевидно, что повторный расчёт выходного параметра при том же наборе входных не приведёт к его изменению. Нами предлагается организовать условно-параллельные опыты. В них варьируются входные параметры модели, значения которых находятся в определенном диапазоне, и исследователь не может оказать влияние на их изменение, но имеет возможность зафиксировать принимаемые ими значения в различных условиях. Искусственно изменяя значения параметров данного класса, исследователь по-

лучит различные значения отклика в данной точке плана, которые можно принять как результаты параллельных опытов. Таким образом моделируется вариабельность параметров, существующая в реальности [1]. Альтернативным способом организации условно-параллельных опытов является генерация соответствующих значений с помощью датчиков случайных чисел. Такой подход позволяет реализовать принцип рандомизации. Компьютерный эксперимент предлагается проводить с учётом вероятностей p_{ij} наступления условий j -го условно-параллельного опыта в i -й точке плана. Если вероятности или другие статистические характеристики аргументов не заданы, хотя сами аргументы являются случайными величинами, то рекомендуется задаваться (на основании априорной информации) законом распределения вероятностей. При отсутствии подходящей информации следует считать вероятности одинаковыми в случае дискретной случайной величины или принимать равномерный закон в случае непрерывной.

5. В каждой точке матрицы плана определяется математическое ожидание целевой функции по условно-параллельным опытам.

6. Строится регрессионная модель в виде полинома второго порядка и проводится ее статистический анализ по следующей схеме:

6.1. Проверка соответствия значений функции отклика в условно-параллельных опытах нормальному закону распределения с помощью критерия согласия Пирсона (χ^2) при объёмах выборки более 50 (иначе можно применить критерий Шапиро-Уилка [5]).

6.2. Проверка однородности дисперсии. При неравномерном дублировании, обусловленном наличием условно-недопустимых опытов, для оценки однородности дисперсии применяется критерий Бартлетта [5]. Неравномерное дублирование опытов в точках плана обусловлено возникновением условно-недопустимых опытов, в которых значение отклика не может быть определено ввиду нарушения ограничений, накладываемых на аргументы целевой функции.

6.3. Оценка значимости коэффициентов регрессионной модели с помощью критерия Стьюдента [5].

6.4. Оценка адекватности регрессионной модели. При выполнении нормального закона распределения отклика рекомендуется использование критерия Фишера, в противном случае - критерия Сиджела-Тьюки [5]. Исследованы подходы к оценке дисперсии воспроизводимости при неравномерном дублировании опытов, в том числе при наличии точек с одним опытом. Предлагается в случае наличия точек с одним опытом при оценке дисперсии воспроизводимости использовать её значение в центре плана или (при отсутствии параллельных опытов в центре плана) принимать среднее значение по всем допустимым точкам плана эксперимента, прошедшим проверку однородности дисперсии.

При получении адекватной регрессионной модели возникает задача её дальнейшего исследования. На значения параметров модели исследуемых процессов накладываются естественные ограничения, вытекающие из сути конкретной задачи, т.е. изначально рассматривается задача условной оптимизации. При нарушении ограничений модели в некоторых точках плана значение отклика не удастся определить, несмотря на то что точка принадлежит области планирования. Предлагается модификация метода поиска экстремума квадратичной функции [3;4] при обнаружении недопустимых точек плана в ходе вычислительного эксперимента.

1. Представление регрессионной модели в виде

$$f = b_0 + \{x\}^T \{b\} + \{x\}^T [B] \{x\},$$

где $\{x\}^T = \{x_1, x_2, \dots, x_k\}$, x_i - факторы, $i = \overline{1, k}$.

Матрица $[B]$ составлена из элементов вектора $\{b\}$:

$$[B] = \begin{cases} b_{ij}, & \text{если } i = j, \\ \frac{1}{2} b_{ij}, & \text{если } i \neq j, \quad i, j = \overline{1, k}, \quad b_{ij} = b_{ji}. \end{cases}$$

2. Вычисление координат стационарной точки $\{x_0\}$:

$$\{x_0\} = -0,5[B]^{-1}\{b\}.$$

3. Расчет значения целевой функции в стационарной точке по зависимости

$$f_0 = b_0 + 0,5\{x_0\}^T\{b\}.$$

4. Приведение целевой функции к каноническому виду с началом координат в точке $\{x_0\}$ и осями, совпадающими с главными осями поверхности f :

$$f = f_0 + \sum_{i=1}^k \lambda_i \varphi_i^2,$$

где λ_i – собственные значения матрицы $[B]$.

Базисные векторы в новой системе координат, в которой целевая функция имеет канонический вид, получаем по формуле

$$\{\varphi\} = [U]^T (\{x\} - \{x_0\}),$$

где $[U]$ – ортогональная матрица, столбцы которой представляют нормированные собственные векторы матрицы $[B]$, соответствующие λ_i .

5. Анализ возможных ситуаций:

5.1. Точка $\{x_0\}$ принадлежит области планирования эксперимента. Если все $\lambda_i > 0$, то она является точкой минимума. Если все $\lambda_i < 0$, то точка $\{x_0\}$ является точкой максимума. Если знаки λ_i различны, то получена седловая точка. Если, например, решается задача минимизации, то в первом случае найденная точка является ее решением, а во втором и третьем – решения нет.

5.2. Стационарная точка оказалась за пределами области планирования. Рекомендуется расширить область планирования, если это осуществимо в реальности, или выполнить процедуры для перехода к новой начальной точке, принадлежащей области планирования. Считая полученную точку центром нового плана эксперимента, следует построить новую регрессионную модель и повторить шаги метода.

Направление движения к новому центру плана определяем в зависимости от вида стационарной точки из эвристических соображений. Для смещения к области планирования эксперимента предлагается построить вектор, соединяющий стационарную точку с первоначальным центром плана:

$$\vec{c} = \{x_c\} - \{x_0\},$$

где $\{x_c\}$ - центр первоначального плана эксперимента.

Также строим вектор

$$\vec{v} = \frac{\alpha \vec{c} \pm \beta \vec{l}}{2}, \quad (1)$$

где \vec{l} – вектор, координаты которого пропорциональны значениям λ_i ($i = \overline{1, k}$) в базисе, составленном из собственных векторов $[B]$. Здесь учитываем, что λ_i характеризует крутизну поверхности отклика в направлении i -го базисного вектора в базисе собственных векторов матрицы $[B]$.

Делаем шаг вдоль вектора \vec{v} , рассчитываемого по формуле (1) при $\alpha = \beta = 1$. Полученную точку рассматриваем как новый центр плана (смещенный относительно первоначального) и повторяем вычислительный эксперимент, получая новую квадратичную регрессионную модель целевой функции. Если полученная точка вновь оказалась за пределами области планирования и не удовлетворяет ограничениям, то шаг корректируется, причем принимается $\beta < 1$.

Если стационарная точка является седловой, то в области исследования функция отклика экстремума не достигает. В качестве оптимальной точки нами предлагается выбрать допустимую точку, входящую в первоначальный план эксперимента, в которой целевая функция достигает наилучшего значения.

Блок-схема алгоритма предложенной методики и метода представлена на рисунке.

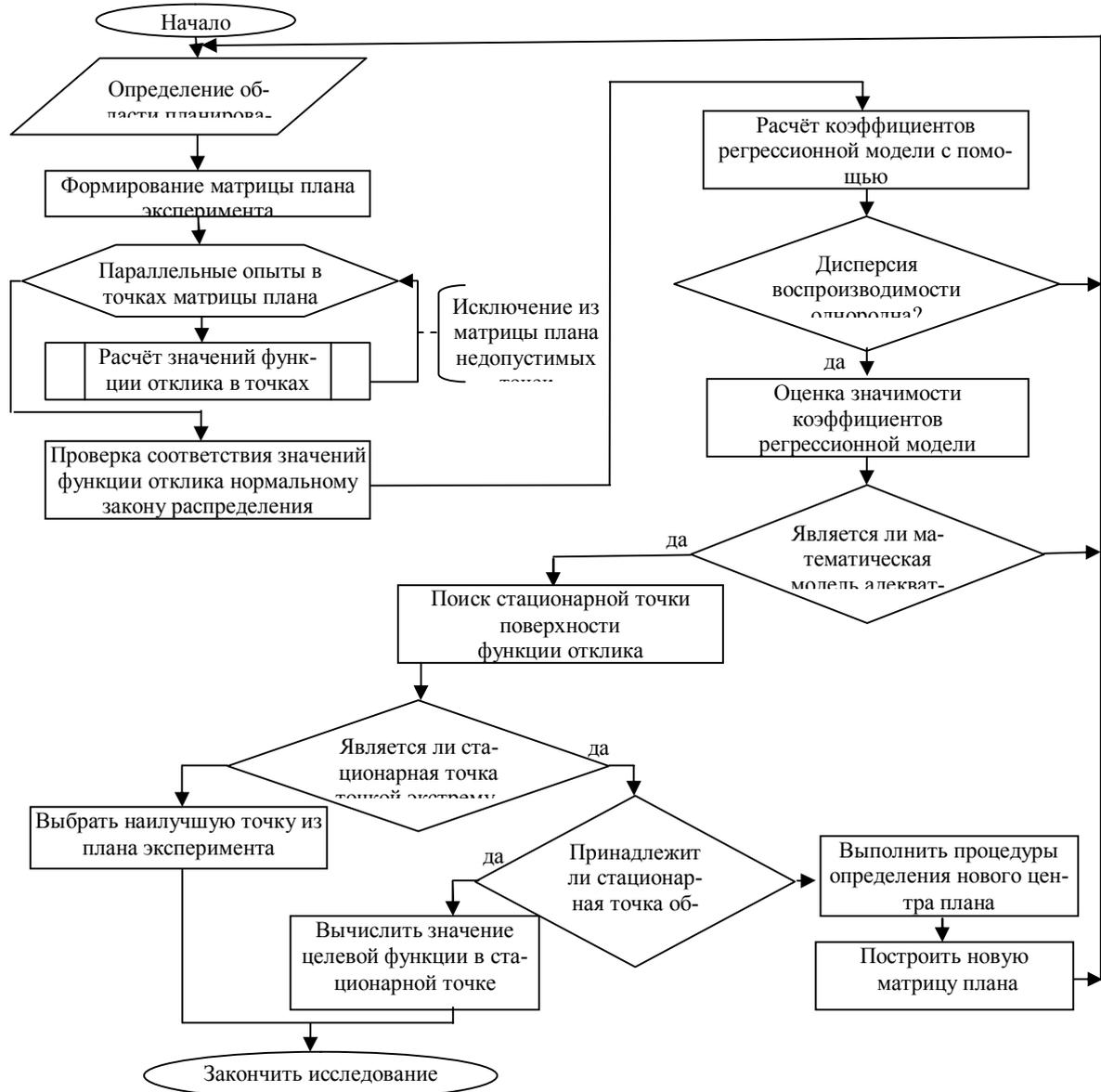


Рис. Блок-схема алгоритма

Методика вычислительного эксперимента и численный метод оптимизации квадратичной регрессионной модели реализованы в комплексе программ «КоптРЕГ» [2], в модулях вычислительного эксперимента («ВычЭксп») и оптимизации («Оквар»).

«КоптРЕГ» был использован при проведении компьютерных экспериментов при исследовании лесозаготовительных процессов. Моделировалась разработка лесосеки с запасом древесины 12 000 м³. В качестве факторов приняты продолжительности работы машин на лесозаготовительных операциях, отклик выражает суммарные энергозатраты рассматриваемых процессов. Для расчёта энергозатрат был использован модуль «МППлес» [6]. Условно-параллельные опыты организованы с учётом изменения производительности машин в зависимости от природно-производственных условий с применением БД «ЛЗтех».

В результате проведения вычислительного эксперимента по представленной методике с равными вероятностями условно-параллельных опытов в точках плана получена регрессионная модель вида

$$f(x_1, x_2, x_3, x_4) = -1413x_1 + 1445x_3 - 414,571x_4 - 253,208x_2^2 - 427,792x_3^2 - 624,119x_4^2 + 326,52x_1x_2 + 886,757x_1x_3 - 760,27x_1x_4 + 548,297x_3x_4 + 22570. \quad (2)$$

Эксперимент с генерацией значений для организации условно-параллельных опытов с помощью датчика псевдослучайных чисел привёл к построению регрессионной модели следующего вида:

$$f(x_1, x_2, x_3, x_4) = -890,66x_1 + 1012,52x_3 - 864,29x_1^2 - 130,04x_1x_4 - 96,98x_2x_3 + 19596,29. \quad (3)$$

При учёте различия вероятностей условно-параллельных опытов в точках плана получена регрессионная модель вида

$$f(x_1, x_2, x_3, x_4) = -1413x_1 + 218,235x_2 + 1500x_3 - 567,475x_4 - 214,186x_2^2 - 562,565x_3^2 - 191,789x_4^2 + 348,082x_1x_2 + 952,214x_1x_3 - 934,283x_1x_4 + 417,658x_3x_4 + 21950. \quad (4)$$

На аргументы моделей (2-4) накладываются ограничения:

$$\begin{cases} P_m[i, j]X_iN_m[i, j] + P_d[i, j]N_d[i, j] > P_{\max[i]} X_iN_{\max[i]}, \\ P_m[i, j]X_iN_m[i, j] < P_{\max[i]}X_iN_{\max[i]}, \\ X_i > 0, \end{cases}$$

где $i = 1, 2, \dots, M$; $j = 1, 2, \dots, 4$; $i \neq m$; i - номер расчётного месяца; j - номер производственной операции; mj - номер производственной операции, выполняемой машиной с максимальной производительностью; $P_m[i, j]$ - производительность основных машин, м³/смена; $N_m[i, j]$ - количество основных машин; $P_d[i, j]$ - производительность дополнительных машин, м³/смена; $N_d[i, j]$ - количество дополнительных машин; $P_{\max[i]}$ - максимальная производительность машин в комплекте, м³/смена; $N_{\max[i]}$ - количество машин с максимальной производительностью в комплекте; X_i - число смен работы машин на i -й операции.

Модели (2-4) представлены без учета незначимых коэффициентов. При построении модели (4) вероятности были распределены с учётом параметров исследуемой лесосеки и статистических данных об их изменении под влиянием различных факторов.

Выполнена оптимизация моделей (2-4) по разработанному методу. Минимальное значение по моделям (2), (3) (энергозатраты, кВт) равно 20425,46 в точке (1,25;1,25;0,75;1,25). При планировании лесозаготовительного процесса без применения вычислительных экспериментов, регрессионных моделей, оптимизации значения энергозатрат - 22354,2 кВт в точке (1,1,1,1) смен. Экономия составляет 1928,74 кВт за три месяца (8,6%). Минимальное значение функции (4) равно 20246,9 кВт в точке (1,25;1; 0,75;1,25). При планировании лесозаготовительного процесса без применения компьютерных экспериментов энергозатраты - 21502,9 кВт в точке (1,1,1,1) смен. Экономия достигает 1256 кВт за три месяца (5,8%). Результаты расчёта экономической эффективности, полученные в ходе компьютерного эксперимента, показали, что организация лесозаготовительных работ с наилучшим сочетанием числа смен работы машин на операциях приводит к сокращению себестоимости лесосечных работ (11%), удельного расхода энергии (10,3%), удельных трудозатрат (19,35%). Экономия расходов на топливо составляет 81737р. за 2 месяца, т.е. до 489222р. в год. Применение представленных методов вычислительного эксперимента, математического моделирования и оптимизации, а также комплекса программ «КОПТРЕГ» позволяет сократить затраты на топливо на 171864,1 р. (30,5%) по сравнению с разработкой конкретной лесосеки без использования дополнительного оборудования и без расчета оптимального числа смен работы машин.

Полученные результаты подтверждают простоту и эффективность практического применения предложенных в данной статье методики вычислительного эксперимента и численного метода оптимизации с применением квадратичных регрессионных моделей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Адлер, Ю.П. Вариации процесса - вот источники прогресса / Ю.П. Адлер, С.Е. Щепетова. - Режим доступа: <http://quality.eup.ru/ECONOM/variabelnost.htm>.
2. Евельсон, Л.И. Методика и комплекс программ для оптимизации на основе вычислительного эксперимента / Л.И. Евельсон, Е.Г. Рыжикова // Материалы Междунар. заоч. науч.-практ. конф. – Пермь, 2013. – 456 с.
3. Евельсон, Л.И. Параметрическая оптимизация гидрогазового поглощающего аппарата ГА-500/ Л.И. Евельсон, Б.Г. Кеглин, Л.А. Манашкин // Динамика, нагруженность и надежность подвижного состава: межвуз. сб. науч. тр.- Днепропетровск: ДИИТ, 1985. - С. 29-36.
4. Монтгомери, Д.К. Планирование эксперимента и анализ данных / Д.К. Монтгомери. – Л.: Судостроение, 1980. – 384 с.
5. Степнов, М.Н. Статистические методы обработки результатов механических испытаний: справочник / М.Н. Степнов. – М.: Машиностроение, 1985. – 232 с.
6. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. МППлес / Евельсон Л.И., Заикин А.Н., Изюмова Е.Г. - №2011618265.

Материал поступил в редколлегию 26.08.14.